



TITLE:

# 多成分反応拡散系における位相波 (非線型・非平衡状態の統計力学, 研究会報告)

AUTHOR(S):

蔵本, 由紀

---

CITATION:

蔵本, 由紀. 多成分反応拡散系における位相波(非線型・非平衡状態の統計力学, 研究会報告). 物性研究 1977, 27(6): F12-F16

ISSUE DATE:

1977-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/89323>

RIGHT:

$$+ P_{00j} X^4 + Q_{00j} X^2 |V|^2 + R_{00j} |V|^4], \quad (13)$$

から計算される。実験によると  $G$  は  $\beta_c$  以上で Taylor 渦流の発生により  $\beta$  に対する増加率がふえるが、 $\beta_{c1}$  付近で増加率が再び減少することが知られている。筆者の行った計算結果によるとこの原因は波状渦流  $|V|^2$  によるものではなく、 $X^4$  の効果によるものであるように思われる ( $|V|^2$  の振幅は  $X^2$  に比して非常に小さい)。

### 参 考 文 献

- 1) K. W. Schwarz, B. E. Springett, R. J. Donnelly, JFM 20 (1964), 281.  
D. Coles, JFM 21 (1965), 385.
- 2) 例えば, P. H. Roberts, Proc. Roy. Soc. A283 (1965), 550.  
E. R. Krueger, A. Gross, R. C. DiPrima, JFM 24 (1966), 521.
- 3) A. Davey, R. C. DiPrima, J. T. Stuart, JFM 31 (1968), 17.  
P. M. Eagles, JFM 49 (1971), 529.  
C. Nakaya, JPSJ 38 (1975), 576.
- 4) R. J. Donnelly and N. J. Simon, JFM 7 (1960), 401.

## 多成分反応拡散系における位相波

京大理 蔵 本 由 紀

### 反応拡散方程式

$$\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{R}(\mathbf{X}) + D \nabla^2 \mathbf{X} \quad (1)$$

(ここに  $\mathbf{X}$  は濃度ベクトル  $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_s)$ ,  $D$  は対角行列) の縮約法として、ひとつは reductive perturbation 法があるが、ここでは全く別の方法を論じ、導出された方程式に基いて、濃度パターンとの関係及び化学乱流発生の条件等を考察する。

この方法は  $\dot{\mathbf{X}} = \mathbf{R}$  が安定なリミットサイクル振動の解をもつ場合に適用できる。まず

phase function  $\phi(\mathbf{r}, t)$  を導入し (この正確な定義はむしろ以下の formulation の過程であたえられる)  $\mathbf{X}$  及び  $\dot{\phi} \equiv \Omega$  が  $\phi$  とその種々の空間微分の汎函数であたえられると仮定する。 $\phi$  の空間変動がゆるやかな現象に着目することにし,  $\nabla \rightarrow \lambda \nabla$  とおいて,  $\mathbf{X}$  と  $\dot{\phi}$  を  $\lambda$  で展開する。(最終的に  $\lambda=1$  とおく。) :

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}(\phi, \nabla \phi, \dots) = \mathbf{X}_0 + \lambda^2 \mathbf{X}_1 + \lambda^4 \mathbf{X}_2 + \dots \quad (2a)$$

$$\Omega = \Omega(\phi, \nabla \phi, \dots) = \Omega_0 + \lambda^2 \Omega_1 + \lambda^4 \Omega_2 + \dots \quad (2b)$$

明らかに  $\mathbf{X}_n, \Omega_n$  は次のような形をもつ,

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{X}_0(\phi), \quad \mathbf{X}_1 = \mathbf{X}_1^{(1)}(\phi) \nabla^2 \phi + \mathbf{X}_1^{(2)}(\phi) (\nabla \phi)^2, \dots \quad (3a)$$

$$\Omega_0 = \Omega_0(\phi), \quad \Omega_1 = \Omega_1^{(1)}(\phi) \nabla^2 \phi + \Omega_1^{(2)}(\phi) (\nabla \phi)^2, \dots \quad (3b)$$

(2) の展開形を (1) に代入すれば (1) の両辺は  $\phi, \nabla \phi, \dots$  だけで書けるが, 各辺を  $\lambda$  のべき及び各べきに対しては更に種々のタイプの項 (例えば  $\lambda^2$  に対しては  $\nabla^2 \phi$  と  $(\nabla \phi)^2$  の2つのタイプが可能) で分類し, 各々に対してバランス方程式を作ると, 未知量  $\{\mathbf{X}_n^{(\nu)}(\phi), \Omega_n^{(\nu)}(\phi)\}$  が  $n$  の低い方から iterative に求まってゆく。ゼロ次のバランス方程式は,

$$\frac{d\mathbf{X}_0(\phi)}{d\phi} \cdot \Omega_0(\phi) = \mathbf{R}(\mathbf{X}_0(\phi)) \quad (4)$$

これは  $s$  個の方程式から成るが, 未知量は  $(\mathbf{X}_0, \Omega_0)$  の  $s+1$  個であり, ひとつだけ余分である。 $\phi$  の定義を適当にあたえることにより, これは解決される。即ち最も便利な  $\phi$  の定義として  $\Omega_0 = 1$  を採用し,  $\mathbf{X}_0(\phi)$  はリミットサイクルの解  $\mathbf{X}_0(\phi + \tau) = \mathbf{X}_0(\phi)$  ととる。これにより位相  $\phi$  は, 状態点がリミットサイクル軌道上を運動するとき常に 1 の早さで増加する量として定義されたことになる。一般項  $(n, \nu)$  に対するバランス方程式の形を示す為に簡略記号  $\mathbf{x} \equiv \mathbf{X}_n^{(\nu)}, \quad \omega \equiv \Omega_n^{(\nu)}, \quad \mathbf{x}' \equiv \{\mathbf{X}_m^{(\mu)}\}, \quad \omega' \equiv \{\Omega_m^{(\mu)}\}$  ( $m < n$ ) を用いると, 結果は

$$\frac{d\mathbf{x}}{d\phi} = \Gamma(\phi) \mathbf{x} + \mathcal{F}(\omega; \mathbf{x}', \omega') \quad (5)$$

の形になることは容易に判る。ここに  $\Gamma = \frac{d\mathbf{R}(\mathbf{X}_0)}{d\mathbf{X}_0}$ ,  $\mathcal{F}$  は求めるべき量  $\omega$  以外に低次の項  $\mathbf{x}', \omega'$  を含んでいる。(5) では再び  $s$  個の方程式に対して  $s+1$  個の未知量がある。

これはリミットサイクル軌道からはずれた状態点に対して、その位相をどのように定義するかを決めていない為である。或は軌道上のどの点からのずれと見るべきかを決めていない為といってもよい。このことを解決する為には少し道具立てが必要である。まず  $g=0$  とした式(5)を考えると、 $\phi$  を  $t$  と読み替えればリミットサイクルからの small disturbance が従う方程式となっていることがわかる。 $\Gamma$  が  $\phi$  の周期函数であることに注意すれば、この方程式の解は Floquet の定理により

$$\mathbf{x}(\phi) = Q(\phi) \exp(A\phi) \cdot \mathbf{x}(0) \quad (6)$$

但し  $Q, A$  は  $s \times s$  行列で後者は  $\phi$  によらない。又、 $Q(\phi+\tau) = Q(\phi)$ ,  $Q(0) = I$  なる条件をみたす。 $A$  の固有値、固有ベクトルを  $A|\ell\rangle = \lambda_\ell|\ell\rangle$ ,  $\ell=1, 2, \dots, s$  によって導入し、 $\mathbf{x}(\phi)$ ,  $g(\phi)$  を

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(\phi) &= \sum_{\ell} \mathbf{x}_{\ell}(\phi) Q(\phi) |\ell\rangle \\ g(\phi) &= \sum_{\ell} g_{\ell}(\phi) Q(\phi) |\ell\rangle \end{aligned}$$

と展開すれば、(5)は

$$\frac{d\mathbf{x}_{\ell}(\phi)}{d\phi} = \lambda_{\ell} \mathbf{x}_{\ell}(\phi) + g_{\ell}(\phi), \quad \ell=1, 2, \dots, s \quad (7)$$

となり、 $g_{\ell}$  は  $\omega(\phi)$ ,  $x'(\phi)$ ,  $\omega'(\phi)$  の函数である。リミットサイクルの安定条件から  $\lambda_{\ell}$  はひとつだけを除いて負である。今  $\lambda_s = 0$  とする。これは軌道に沿う disturbance が回復しないという事情に対応している。

さて、軌道から外れた状態に対する位相の定義の問題に戻れば、ずれ  $\delta\mathbf{X}(\phi, \nabla\phi, \dots) \equiv \mathbf{X} - \mathbf{X}_0(\phi) = \sum \delta X_{\ell} Q(\phi) |\ell\rangle$  に対して、 $\delta X_s = 0$  を要請することが自然である。即ち、軌道上の  $\phi$  点を含む部分空間  $Q(\phi) \cdot (|1\rangle, |2\rangle, \dots, |s-1\rangle)$  を考え、状態点がこの部分空間内にあれば、その状態点の位相が  $\phi$  であるとするのである。これにより、(7)において  $x_s = 0$  としてよく、前記の不定性は除去された。このことから、更に  $g_s = 0$ 。これを解けば  $\omega(\phi)$  が  $x'(\phi)$ ,  $\omega'(\phi)$  の函数として求まり、更にこの  $\omega(\phi)$  の表式を残りの  $s-1$  個の方程式(7)に代入すれば  $x_{\ell}(\phi)$  が  $x'(\phi)$ ,  $\omega'(\phi)$  の函数として求まることになる。このようにゼロ次の方程式(4)の解を known として iterative にすべての量  $\{\mathbf{X}_n^{(j)}(\phi), \Omega_n^{(j)}(\phi)\}$  が解けてゆくことになる。そして  $\phi \rightarrow \infty$  (即ち  $t \rightarrow \infty$ )

で  $\{\mathbf{X}_n^{(\nu)}, \Omega_n^{(\nu)}\}$  はすべて  $\phi$  の周期函数 (周期  $\tau$ ) となることがわかる。結局  $\mathbf{X}$  と  $\dot{\phi}$  は

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_0(\phi) + \mathbf{X}_1^{(1)}(\phi) \nabla^2 \phi + \mathbf{X}_1^{(2)}(\phi) (\nabla \phi)^2 + \dots \quad (8a)$$

$$\dot{\phi} = 1 + \Omega_1^{(1)}(\phi) \nabla^2 \phi + \Omega_1^{(2)}(\phi) (\nabla \phi)^2 + \dots \quad (8b)$$

なる形式で求まり、これらの展開係数は  $t \rightarrow \infty$  で  $\phi$  の周期函数となることがわかった。

$\mathbf{X}$  に対してゼロ次近似  $\mathbf{X} = \mathbf{X}_0(\phi)$  を採用すると物理的描像は極めて単純となる。即ち、空間の各点における状態点はすべてリミットサイクル軌道上にあるが、その位相は空間的・時間的に変化し、その変化を支配するのが  $\phi$  に関して閉じた方程式 (8b) なのである。

(8b) はなお簡単な形に変形できる。いま  $\phi = t + \theta$  とおけば、(8b) 式で、next dominant term までとり入れた式は、

$$\dot{\theta} = \Omega_1^{(1)}(t + \theta) \nabla^2 \theta + \Omega_1^{(2)}(t + \theta) (\nabla \theta)^2 \quad (9)$$

となる。 $\theta$  の時間変動は充分ゆるやかであるのに対して、係数  $\Omega_1^{(1)}(t + \theta)$ ,  $\Omega_1^{(2)}(t + \theta)$  は普通の早さで変化する。したがってそれらは一周期に亘っての平均でおきかえることができる。このようにして、

$$\dot{\theta} = \nu \nabla^2 \theta + \mu (\nabla \theta)^2 \quad (10)$$

$$\nu = \tau^{-1} \int_0^\tau \Omega_1^{(1)}(\phi) d\phi, \quad \mu = \tau^{-1} \int_0^\tau \Omega_1^{(2)}(\phi) d\phi$$

が得られる。

次に方程式 (10) と濃度パターン形式との関係を述べる。 $\mathbf{X} = \mathbf{X}_0(t + \theta)$  と近似したことにより、等濃度線は  $\theta(\mathbf{r}, t) = n\tau - t$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ) をみたす時空点の集まりであたえられる。即ち (10) を解き、その解を (11) に代入すればパターン  $\mathbf{r}(t)$  が求まる。

最後に方程式 (10) と化学乱流発生の関係を調べる。乱流は  $\nu < 0$  の場合に起り (Prog. Theor. Phys. 56 (1976), 679, 681) この時 (10) の解は物理的に無意味になる。 $\nu$  の一般的表式は前述の一般論から、

$$\nu = \overline{\Omega_1^{(1)}(\phi)}$$

$$\Omega_1^{(1)}(\phi) = \langle s | Q^{-1} D Q | s \rangle \quad (12)$$

となるが、すべての拡散係数が等しい時、(12)は明らかに正であるから乱流は発生しない。つまり乱流の発生にとっては拡散係数の相異は不可欠である。更に、 $Q|s\rangle = d\mathbf{X}_0(\phi)/d\phi$  が軌道上の  $\phi$  点において軌道に接するベクトルであることに注意すれば乱流発生の条件の幾何学的解釈は容易になる。即ち、いま種々の拡散係数の間の差を大きくしていったとき、一般に  $D$  は  $Q|s\rangle$  に作用することによって後者の方向を大きく変えることになるが、その結果、ついに  $DQ|s\rangle$  が部分空間  $Q \cdot (|1\rangle, |2\rangle, \dots |s-1\rangle)$  を横切って反対側に現われるとき、 $\Omega_1^{(1)}(\phi)$  は負の量となる。軌道の一周に亘ってこのような寄与が dominant であるとき  $\nu$  は負となる。

## Theoretical Study of a Chemical Turbulence

九大理 藤 坂 博 一

九大工 山 田 知 司

乱流状態の統計力学の建設は長い間統計物理学者にとって重要な問題の一つである。流体力学では乱流状態を deterministic non-periodic flow<sup>1)</sup> と解釈する仕方が一般的になりつつある。つまり、従来の狭い意味の不可逆過程の統計力学のように不規則性は project out された空間での dynamics に起因するのではなく、deterministic な微分方程式の非周期解に起因するという立場である。

このような観点にたって Kuramoto-Yamada は化学反応系の一つのモデル方程式

$$\frac{\partial w}{\partial t} = w + (1 + i c_1) \nabla^2 w - (1 + i c_2) |w|^2 w, \quad (1)$$

を simulate した。 $\nu (= 1 + c_1 c_2)$  が正のときは、周期解が安定になり、化学反応におけるパターンの形成の説明は基本的には  $\nu > 0$  に対する式 (1) で解釈できる。一方、 $\nu$